

عنوان مقاله:

بررسی نظری اتصال آلاینده های رنگ آزو به گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن جهت تصفیه فاضلاب

محل انتشار:

دومین همایش ملی علوم و فناوری های نوین در آذربایجان (سال: 1396)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

مریم هزاخانی - دانشجو، کارشناسی ارشد محیط زیست، گروه محیط زیست، دانشکده منابع طبیعی و محیط زیست، دانشگاه ملایر

رحیم قدری - استادیار، دکترای شیمی آلی، گروه شیمی آلی و بیوشیمی، دانشکده شیمی، دانشگاه تبریز

کامران شایسته - استادیار، دکترای برنامه ریزی محیط زیست، گروه محیط زیست، دانشکده منابع طبیعی و محیط زیست، دانشگاه ملایر

خلاصه مقاله:

مطالعات سیستماتیک به منظور بررسی خصوصیات اتصال ده آلاینده رنگ آزو منتخب با گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن انجام شد. جهت مطالعه مذکور، hydrolyzed Reactive Black ۵H، Direct Blue ۷۱، Acid Orange ۵۲، Blue ۱۱۳، hydrolyzed Reactive Orange ۱۶H، Acid Orange ۸، Acid Orange ۷، Acid Orange ۵، Acid Blue ۲۹

انتخاب شدند. مطالعات داکینگ جهت ارائه بهترین حالات اتصال بین رنگ آزو و گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن انجام شد. انرژی های اتصال محاسبه شده با روش داکینگ نشان داد که تمامی آلاینده های رنگ آزو انتخابی تمایل بالایی برای جذب شدن توسط گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن را دارند که نشان دهنده کارایی بالای گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن برای حذف آلاینده های رنگ آزو است. همچنین، در بین رنگ های آزو انتخابی Direct Blue ۷۱، Blue ۱۱۳ و Acid Blue ۲۹ بیشترین تمایل برای اتصال به گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن را از خود نشان دادند. ۲۹ بیشترین تمایل برای اتصال به گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن را از خود نشان دادند.

کلمات کلیدی:

رنگ آزو، گرافن اکسید دوپ شده با نیتروژن، شبیه سازی دینامیک مولکولی، واندروالس، الکتروستاتیک، پیوند هیدروژنی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1326390>

